

## サブ課題A: 新エネルギー源の創出・確保－太陽光エネルギー

サブ課題代表者: 天能 精一郎

### 2. 学会等における口頭・ポスター発表

#### (1) 口頭発表

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Recent advances in explicitly correlated F12 electronic structure theory	Seiichiro Ten-no	CMSI International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems, University of Tokyo	2015年2月	国内	
2	Recent advances in explicitly correlated F12 electronic structure theory	Seiichiro Ten-no	Université Pierre et Marie Curie	2015年2月	国外	
3	サブ課題A「新エネルギー源の創出・確保－太陽光エネルギー」研究計画概要	天能 精一郎	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
4	サブ課題A 研究事例「太陽光エネルギー変換の理論計算化学」	山下 晃一	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
5	基盤アプリ開発「ポスト京の基盤アプリ開発とコデザイン体制」	中嶋 隆人	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	

## サブ課題B: エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー

サブ課題代表者: 杉野 修

### 2. 学会等における口頭・ポスター発表

#### (1) 口頭発表

No.	発表した成果(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」全体計画	岡崎 進	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
2	サブ課題B「エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー」研究計画概要	杉野 修	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
3	サブ課題B 研究事例「「京」を用いたリチウムイオン電池内機構の第一原理シミュレーション」	館山 佳尚	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	

4	Computational Molecular Technology towards Macroscopic Chemical Phenomena -Molecular Control of Complex Chemical Reactions, Stereospecificity and Aggregate Structures-	M. Nagaoka	11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2015) (Athens/Greece)	2015年3月	国外	
5	マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築-複合化学反応・立体特異性・集合体構造の分子制御-	長岡 正隆	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	

(2)ポスター発表

No.	発表した成果 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Theoretical Investigation at Oxide Cathode/Sulfide Electrolyte Interfaces for All-Solid-State Li-Ion Batteries、	春山潤、袖山慶太郎、高田和典、館山佳尚	つくばエポカル (MANA International Symposium 2015)	2015年3月	国内	

サブ課題C: エネルギー・資源の有効利用ー化学エネルギー

サブ課題代表者: 田中 秀樹

2. 学会等における口頭・ポスター発表

(1)口頭発表

No.	発表した成果 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Structure, Dynamics, and Thermodynamic Stability of Clathrate Hydrates and High Pressure Filled Ices, Plenary	H. Tanaka	The 5th Annual Basic Science International Conference (BaSIC 2015), ATRIA HOTEL & CONFERENCE MALANG, Malang, Indonesia	2015年2月	国外	
2	サブ課題C「エネルギー・資源の有効利用ー化学エネルギー」研究計画概要	田中 秀樹	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
3	サブ課題C 研究事例「二酸化炭素分離回収に関する理論化学シミュレーション: 「京」の成果とポスト「京」の計画」	中井 浩巳	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第1回公開シンポジウム	2015年3月	国内	
4	Efficient Two-Component Relativistic Method for Large Systems	Hiromi Nakai	11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2015) (Athens/Greece)	2015年3月	国外	
5	近接場光による分子振動励起の理論計算手法の開発	岩佐豪、武次徹也	日本物理学会第70回年次大会	2015年3月	国内	

6	表面固定化Ir触媒による高位置選択的C-Hホウ素化反応に関する理論的研究: GRRM/SC-AFIR法の応用	高敏、前田理、村上遼、岩井智弘、澤村正也、武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
7	無輻射失活経路の自動探索: 蛍光量子収率の定性的な予測へ向けて	原渕祐、前田理、武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
8	GRRM/AFIR法によるトリエチルボラン/酸素系の自動酸化機構に関する理論的研究	坂千尋、植松遼平、前田理、武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
9	パラジウム(II)触媒を用いるチオベンズアニリドのC-H官能基化/分子内C-S結合形成反応の機構解析: GRRM/AFIR法による理論的研究	植松遼平・前田理・Musaev Djamaladdin G.・武次徹也	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	
10	わずかな構造相違を鋭敏に反映する異方性Au <sub>6</sub> クラスターの発光特性	張明哲・岩佐豪・小野ゆり子・武次徹也・大曲駿・中西貴之・長谷川靖哉・七分勇勝・小西克明	日本化学会 第95春季年会 (2015)	2015年3月	国内	